

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ АДДУКТОВ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИМИДИНА С МОЛЕКУЛЯРНЫМ ИОДОМ

Зарубина А. О., Черновьянц М. С.

Южный федеральный университет, химический факультет, Зорге, 7, Ростов-на-Дону, 344090, Россия, E-mail: karginova-anastasiya@mail.ru

Аналитическая химия биологически активных соединений является приоритетной областью развития современной аналитической химии. К биологически активным соединениям относится ряд классов органических соединений, среди которых выделяются гетероароматические тиамины. Например, 4-трифторметилпиридин-2-тион (1), 2-меркапто-4-метилпиридингидрохлорид (2) и 2-меркапто-5-*n*-пропилпиридин (3) являются потенциальными тиреостатиками.

Одна из наиболее важных областей изучения веществ, перспективных в качестве антидиуретических препаратов, – определение их σ -донорной способности по отношению к молекулярному иоду.¹⁻² В связи с этим особый интерес вызывает изучение характера взаимодействия исследуемых веществ с молекулярным иодом в различных растворителях.

Координирующая способность исследуемых соединений и по отношению к молекулярному иоду была оценена спектрофотометрически методом сдвига равновесия.

ЭСП комплексов 4-трифторметилпиридин-2-тиона с иодом представлены на рисунке 1. ЭСП аддуктов соединений (2) и (3) с молекулярным иодом имеет аналогичный вид и отличается лишь положением максимумов поглощения.

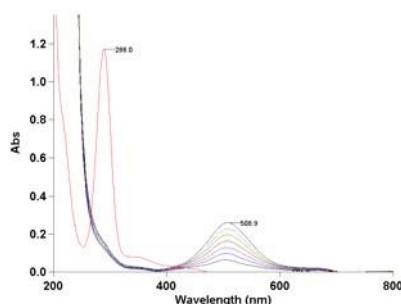


Рисунок 1 - ЭСП раствора 2-меркапто-4-трифторметилпиридина с иодом: $C_{2\text{М-4ФПир}} = 4 \cdot 10^{-5}$ М, C : 0 (1), $8 \cdot 10^{-5}$ (2), $1.2 \cdot 10^{-4}$ (3), $1.6 \cdot 10^{-4}$ (4), $2.0 \cdot 10^{-4}$ (5), $2.4 \cdot 10^{-4}$ (6), $2.8 \cdot 10^{-4}$ (7), $3.2 \cdot 10^{-4}$ (8). $\epsilon = 874,3 \text{ л/(моль} \cdot \text{см)}$.

Число молекул иода, координированных тиамином, и константу стабильности молекулярного аддукта оценивали с использованием функции «среднеиодное число»³.

Равновесная концентрация иода была рассчитана по уравнению: $[I_2] = \frac{A_{\text{max}}}{\epsilon \cdot l \cdot I_2}$.

Для каждой равновесной концентрации иода рассчитывали соответствующее значение среднеиодного числа по уравнению: $n_{I_2} = \frac{C_{I_2} - [I_2]}{C_{\text{Het}} - S}$, где C и аналитические концентрации тиамида и молекулярного иода соответственно. Константы устойчивости β для

$0 < n_{I_2} < 1$ рассчитывали методом наименьших квадратов по уравнению: $\frac{n_{I_2}}{(1 - n_{I_2})} = \beta [I_2]$.

Методом УФ-спектроскопии установлено, что 4-трифторметилпиридин-2-тион, 2-меркапто-4-метилпиридингидрохлорид и 2-меркапто-5-*n*-пропилпиридин образуют комплексы переноса заряда с молекулярным иодом, логарифмы констант устойчивости комплексов соответственно равны 3.59, 3.20 и 3.41.

Библиографический список

1. Hippler, F.; Winter, M.; Fisher, R.A.; *J Mol Struct* 2003, **658**, 179.
2. Song, J.L.; Zhou, W.B.; Zeng, H.Y.; Dong, Z.C. *Acta Crystallogr. Sect. E* 2002, **58**, 1045
3. Chernov'yants, M.S.; Podgornaya, E. B.; Pyshchev, A. I.; Shcherbakov, I. N. *Russ. J. Gen. Chem.* 1998, **68**, 775.